

1 固有値問題

与えられた行列 A について, 方程式 $Ax = \lambda x$ を満たす λ と $x \neq 0$, 即ち固有値, 固有ベクトルを求める問題を固有値問題という.¹

命題 1. λ が A の固有値である事と $|A - \lambda I| = 0$ は同値.

Proof. λ が A の固有値である事が $(A - \lambda I)x = 0$ なる $x \neq 0$ が存在する事と同値であることに注意すれば良い. $\square$

命題 2. 任意の正則行列 B について $C := B^{-1}AB$ は A と同じ固有値を持つ

Proof. 正則性より $|B| \neq 0$, $|B^{-1}| \neq 0$ であるので

$$|C - \lambda I| = |B^{-1}(A - \lambda I)B| = |B|^{-1}|A - \lambda I||B| = |A - \lambda I|$$

$\square$

1.1 固有値を求める (ヤコビ法)

対角行列 D の固有値はその対角成分に等しい事に注意せよ. (実際 e_i を第 i 成分方向への単位ベクトルとすれば $De_i = d_{ii}e_i$) これと命題 2 を併せれば, 行列 A を対角化 $D = B^{-1}AB$ する事ができれば D の成分を見る事によって固有値を得る事ができる.

ヤコビ法は反復法によって行列を対角化し, 固有値を求める実対称行列に対する古典的な方法である.

以下 A は実対称行列, 即ち $A = A^T$ で全ての成分が実数と仮定する.

$A^{(0)} := A$ とし, 帰納的に $A^{(k)}$ に対し $A^{(k+1)}$ を次の様に決める.

- $A^{(k)}$ の非対角成分 $a_{i,j}^{(k)}$ の中で絶対値が最大になる $a_{p,q}^{(k)}$ ($p < q$) を探す.
- $\theta^{(k)} := \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{-2a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}$ において行列 $P^{(k)} = (p_{i,j}^{(k)})$ を次で定める;

$$p_{i,j}^{(k)} := \begin{cases} \cos \theta^{(k)} & \text{if } i = j = p \\ \sin \theta^{(k)} & \text{if } i = p \text{ and } j = q \\ -\sin \theta^{(k)} & \text{if } i = q \text{ and } j = p \\ \cos \theta^{(k)} & \text{if } i = j = q \\ 1 & \text{if } i = j \text{ and } i \neq p, q \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- $A^{(k+1)} := (P^{(k)})^{-1}A^{(k)}P^{(k)}$

このとき各 $a_{i,i}^{(k)}$ が固有値に収束する.

命題 3. $A^{(k)}$ は次の意味で対角行列に収束する;

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2 \rightarrow 0.$$

特にある $r < 1$, $C > 0$ があって

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2 \leq Cr^k.$$

¹一般の特に高次の行列 A について固有値を求める事は難しい. $n \times n$ の行列の固有値を求める事は n 次の方程式を解くことに帰着できるが, 良く知られているように 5 次以上の方程式に一般的な解の公式は存在しない.

相似変換 $\mathbf{A}^{(k+1)} := \mathbf{P}^{(k)-1} \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{P}^{(k)}$ によって固有値が保存される事を考えれば, 次の命題により各 $a_{i,i}^{(k)}$ が固有値に収束する事が分る.

命題 4.

$$\sum_{i \neq j} |b_{i,j}| \leq \varepsilon$$

なる行列 $\mathbf{B} = (b_{i,j})$ の固有値は $\Delta_i := \{z \mid |z - b_{i,i}| \leq \varepsilon\}$ なる集合の共通部分 $\Delta := \bigcup_i \Delta_i$ に含まれる.

Proof of Prop 3. $\mathbf{A}^{(k+1)}$ の各成分は定義により,

$$\begin{aligned} a_{p,p}^{(k+1)} &= \cos \theta^{(k)} a_{p,p}^{(k)} \cos \theta^{(k)} - \cos \theta^{(k)} a_{p,q}^{(k)} \sin \theta^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{q,p}^{(k)} \cos \theta^{(k)} + \sin \theta^{(k)} a_{q,q}^{(k)} \sin \theta^{(k)} \\ a_{p,q}^{(k+1)} &= \cos \theta^{(k)} a_{p,p}^{(k)} \sin \theta^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{p,q}^{(k)} \cos \theta^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{q,p}^{(k)} \sin \theta^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{q,q}^{(k)} \cos \theta^{(k)} \\ a_{q,p}^{(k+1)} &= \sin \theta^{(k)} a_{p,p}^{(k)} \cos \theta^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{p,q}^{(k)} \sin \theta^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{q,p}^{(k)} \cos \theta^{(k)} - \cos \theta^{(k)} a_{q,q}^{(k)} \sin \theta^{(k)} \\ a_{q,q}^{(k+1)} &= \sin \theta^{(k)} a_{p,p}^{(k)} \sin \theta^{(k)} + \sin \theta^{(k)} a_{p,q}^{(k)} \cos \theta^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{q,p}^{(k)} \sin \theta^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{q,q}^{(k)} \cos \theta^{(k)} \\ a_{p,j}^{(k+1)} &= \cos \theta^{(k)} a_{p,j}^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{q,j}^{(k)} \\ a_{q,j}^{(k+1)} &= \sin \theta^{(k)} a_{p,j}^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{q,j}^{(k)} \\ a_{i,p}^{(k+1)} &= a_{i,p}^{(k)} \cos \theta^{(k)} - a_{i,q}^{(k)} \sin \theta^{(k)} \\ a_{i,q}^{(k+1)} &= a_{i,p}^{(k)} \sin \theta^{(k)} + a_{i,q}^{(k)} \cos \theta^{(k)} \\ a_{i,j}^{(k+1)} &= a_{i,j}^{(k)} \end{aligned}$$

ただし $i, j \neq p, q$. $\mathbf{A}^{(k)}$ に対称性があると仮定すれば整理できて

$$\begin{aligned} a_{p,p}^{(k+1)} &= a_{p,p}^{(k)} \cos^2 \theta^{(k)} - a_{p,q}^{(k)} \sin 2\theta^{(k)} + a_{q,q}^{(k)} \sin^2 \theta^{(k)} \\ a_{p,q}^{(k+1)} = a_{q,p}^{(k+1)} &= \frac{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}{2} \sin 2\theta^{(k)} + a_{p,q}^{(k)} \cos 2\theta^{(k)} \\ a_{q,q}^{(k+1)} &= a_{p,p}^{(k)} \sin^2 \theta^{(k)} + a_{p,q}^{(k)} \sin 2\theta^{(k)} + a_{q,q}^{(k)} \cos^2 \theta^{(k)} \\ a_{p,j}^{(k+1)} = a_{j,p}^{(k+1)} &= \cos \theta^{(k)} a_{p,j}^{(k)} - \sin \theta^{(k)} a_{q,j}^{(k)} \\ a_{q,j}^{(k+1)} = a_{j,q}^{(k+1)} &= \sin \theta^{(k)} a_{p,j}^{(k)} + \cos \theta^{(k)} a_{q,j}^{(k)} \\ a_{i,j}^{(k+1)} &= a_{i,j}^{(k)} \end{aligned}$$

であり $\mathbf{A}^{(k+1)}$ も対称行列, $\mathbf{A}^{(0)}$ は対称行列なので帰納法により上の仮定は正しい. 特に $\theta^{(k)}$ の取り方により $a_{p,q}^{(k+1)} = a_{q,p}^{(k+1)} = 0$ である. また

$$(a_{p,j}^{(k+1)})^2 + (a_{q,j}^{(k+1)})^2 = (a_{p,j}^{(k)})^2 + (a_{q,j}^{(k)})^2$$

であるから,

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k+1)})^2 = \sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2 - 2(a_{q,p}^{(k)})^2$$

$a_{q,p}^{(k)}$ の最大性より

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k+1)})^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2$$

□